

ОБОБЩЕНИЯ СТАДИЙНОГО ПОРЯДКА МЕТОДОВ РУНГЕ–КУТТЫ

© 2024 г. Л. М. Скворцов^{1,*}

¹127051 Москва, Трубная ул., 51, корп. 1, ООО “ЗВ Сервис”, Россия
^{*e-mail:} lm.skvo@gmail.com

Поступила в редакцию 27.05.2024 г.

Переработанный вариант 02.07.2024 г.

Принята к публикации 23.08.2024 г.

Рассматривается применение методов Рунге–Кутты для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений и дифференциально-алгебраических уравнений. При решении таких задач часто проявляется эффект снижения порядка, когда при заданной точности реальный порядок метода оказывается ниже классического порядка, что неизбежно приводит к повышению вычислительных затрат. Чтобы избежать снижения порядка, метод должен иметь достаточно высокий стадийный порядок. Однако методы, обеспечивающие наиболее удобную и эффективную реализацию, имеют низкий стадийный порядок. Поэтому актуальна задача построения методов, которые при низком стадийном порядке обладают свойствами методов более высокого стадийного порядка. Настоящая статья посвящена построению методов такого типа. Рассматриваются однократно диагонально-неявные, явные и обратные к явным методы. Приведены результаты решения тестовых задач. Библ. 44. Фиг. 3. Табл. 4.

Ключевые слова: методы Рунге–Кутты, жесткие и дифференциально-алгебраические задачи, стадийный порядок, псевдостадийный порядок, слабый стадийный порядок, квазистадийный порядок.

DOI: 10.31857/S0044466924120055, **EDN:** KCDGDO

1. ВВЕДЕНИЕ

Один шаг численного решения задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ)

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$$

выполняется согласно следующим формулам:

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{f} \left(t_0 + c_i h, \mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} \mathbf{F}_j \right), \quad i = 1, \dots, s, \quad \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{F}_i, \quad (1.1)$$

где h – размер шага, s – число стадий. Коэффициенты метода обычно представляют в виде таблицы Бутчера

$$\begin{array}{c|ccccc} & c_1 & & a_{11} & \cdots & a_{1s} \\ \mathbf{c} & \vdots & & \vdots & \cdots & \vdots \\ & c_s & & a_{s1} & \cdots & a_{ss} \\ \hline \mathbf{b}^\top & & & b_1 & \cdots & b_s \end{array}.$$

В методах с автоматическим выбором размера шага дополнительно вычисляют вектор

$$\hat{\mathbf{y}}_1 = \mathbf{y}_0 + h \sum_{i=1}^s \hat{b}_i \mathbf{F}_i, \quad (1.2)$$

позволяющий получить оценку локальной ошибки в виде нормы вектора $\mathbf{y}_1 - \hat{\mathbf{y}}_1$. Формулу (1.2) называют вложенной, а вместе с (1.1) – вложенной парой методов Рунге–Кутты. В таблице Бутчера коэффициенты \hat{b}_i вложенной пары приводят под коэффициентами b_i .

Метод является явным, если $a_{ij} = 0$ при $j \geq i$, в противном случае он неявный. Неявный метод, имеющий $a_{ij} = 0$ при $j > i$, называется диагонально-неявным (DIRK). Среди методов DIRK обычно применяют однократно диагонально-неявные (SDIRK), у которых все диагональные элементы a_{ii} равны между собой, а также аналогичные методы с явной первой стадией (ESDIRK). Достоинством методов DIRK является то, что среди неявных методов они наиболее просто и эффективно реализуются.

Неявный метод называется жестко точным, если $b_i = a_{si}$, $i = 1, \dots, s$. Стадийный порядок (СП) метода определяется как наибольшее целое q , для которого выполняются равенства

$$k \mathbf{A} \mathbf{c}^{k-1} = \mathbf{c}^k, \quad k \mathbf{b}^T \mathbf{c}^{k-1} = 1, \quad k = 1, \dots, q$$

(здесь и далее предполагаем покомпонентное выполнение операций умножения и возведения в степень для векторов). СП явных методов и SDIRK не может быть больше 1, а методов ESDIRK – больше 2.

Основным показателем, характеризующим точность методов решения задачи Коши, является порядок сходимости p . При $h \rightarrow 0$ глобальная ошибка пропорциональна h^p . Для нежестких задач ошибки различных компонент решения, соответствующих элементарным дифференциалам, определяются через коэффициенты погрешности, задаваемые в виде

$$e(T_{ij}) = 1 - \gamma(T_{ij}) \mathbf{b}^T \Phi(T_{ij}),$$

где T_{ij} – корневое дерево i -го порядка (существует взаимно однозначное соответствие между корневыми деревьями и элементарными дифференциалами). Например, $e(T_{32}) = 1 - 6\mathbf{b}^T \mathbf{A} \mathbf{c}$. Значения $\gamma(T_{ij})$ и $\Phi(T_{ij})$ для деревьев до 5-го порядка включительно приведены в [1], [2].

Для решения жестких задач обычно применяют неявные методы, которые обеспечивают устойчивость численного решения при достаточно большом размере шага. Но при этом реальный порядок сходимости может быть ниже классического порядка, что приводит к увеличению вычислительных затрат для достижения заданной точности. Чтобы избежать снижения порядка, следует использовать жестко точные методы, имеющие достаточно высокий СП (снижение порядка отсутствует при $q = p$ и небольшое при $q = p - 1$). Феномен снижения порядка впервые был объяснен с помощью уравнения Протеро–Робинсона

$$y' = \lambda(y - \varphi(t)) + \varphi'(t), \quad y(t_0) = \varphi(t_0), \quad (1.3)$$

(см. [3]), имеющего решение $y(t) = \varphi(t)$.

Исследование сходимости численного решения с помощью уравнения (1.3) выполнялось в [2]–[6] и многих других работах, где отмечалась важность высокого СП для эффективного решения жестких задач. В [7]–[24] предлагались методы, построенные на основе минимизации ошибки решения этого и некоторых других простейших уравнений. Такой подход позволяет уменьшить снижение порядка. Уравнение (1.3) является линейным, что не всегда позволяет объяснить поведение ошибки при решении нелинейных задач. В [2], [9], [11] приведены результаты решения жестких задач, которые невозможно объяснить ни в рамках классической теории, ни с помощью уравнения Протеро–Робинсона. В [2], [8], [11] были рассмотрены простейшие модельные уравнения, позволившие объяснить поведение ошибки в этих случаях. На их основе сформированы функции погрешности $e_{ij}(z)$, определенные как локальные относительные ошибки решения соответствующих модельных уравнений в зависимости от значения $z = h\lambda$. При заданном i число таких функций n_i равно числу различных корневых деревьев порядка i для методов Рунге–Кутты, применяемых к дифференциально-алгебраическим уравнениям (ДАУ) индекса 1 (см. [2], [5]). При $i = 2$ имеется одна такая функция, при $i = 3$ их две, а при $i = 4$ – пять. Функции погрешности задаются в виде

$$e_{ij}(z) = z \mathbf{b}^T (\mathbf{I} - z \mathbf{A})^{-1} \mathbf{d}_{ij} + 1 - i \mathbf{b}^T \mathbf{c}^{i-1}, \quad j = 1, \dots, n_i,$$

где

$$\mathbf{d}_{ij} = \frac{\gamma(T_{i+1,j})}{i+1} \Phi(T_{i+1,j}) - i \mathbf{A} \mathbf{c}^{i-1}.$$

Жесткие модельные уравнения и соответствующие им значения \mathbf{d}_{ij} для $i \leq 4$ приведены в табл. 1, где $\mathbf{e} = (1, \dots, 1)^T$, а переменные x_{ij} задаются следующими уравнениями:

$$x'_1 = 1, \quad x'_{21} = x_1, \quad x'_{31} = x_1^2, \quad x'_{32} = x_{21}, \quad x_{ij}(0) = 0.$$

Используемые на практике методы удовлетворяют условию 1-го СП, поэтому уравнения относительно x_1 и y_1 решаются точно, а все уравнения относительно y_{i1} – это фактически уравнения (1.3) при $\varphi(t) = t^i$. Функции

Таблица 1. Жесткие модельные уравнения и значения \mathbf{d}_{ij}

i	j	Уравнение	$y_{ij}(t)$	\mathbf{d}_{ij}
1	1	$y'_1 = \lambda(y_1 - x_1) + 1$	t	$\mathbf{d}_1 = \mathbf{c} - \mathbf{Ae}$
2	1	$y'_{21} = \lambda(y_{21} - x_1^2) + 2t$	t^2	$\mathbf{d}_{21} = \mathbf{c}^2 - 2\mathbf{Ac}$
3	1	$y'_{31} = \lambda(y_{31} - x_1^3) + 3t^2$	t^3	$\mathbf{d}_{31} = \mathbf{c}^3 - 3\mathbf{Ac}^2$
	2	$y'_{32} = \lambda(y_{32} - x_1x_{21}) + 3t^2/2$	$t^3/2$	$\mathbf{d}_{32} = 2\mathbf{c}(\mathbf{Ac}) - 3\mathbf{Ac}^2$
	1	$y'_{41} = \lambda(y_{41} - x_1^4) + 4t^3$	t^4	$\mathbf{d}_{41} = \mathbf{c}^4 - 4\mathbf{Ac}^3$
4	2	$y'_{42} = \lambda(y_{42} - x_1^2x_{21}) + 2t^3$	$t^4/2$	$\mathbf{d}_{42} = 2\mathbf{c}^2(\mathbf{Ac}) - 4\mathbf{Ac}^3$
	3	$y'_{43} = \lambda(y_{43} - x_1x_{31}) + 4t^3/3$	$t^4/3$	$\mathbf{d}_{43} = 3\mathbf{c}(\mathbf{Ac}^2) - 4\mathbf{Ac}^3$
	4	$y'_{44} = \lambda(y_{44} - x_1x_{32}) + 2t^3/3$	$t^4/6$	$\mathbf{d}_{44} = 6\mathbf{c}(\mathbf{A}^2\mathbf{c}) - 4\mathbf{Ac}^3$
	5	$y'_{45} = \lambda(y_{45} - x_{21}^2) + t^3$	$t^4/4$	$\mathbf{d}_{45} = 4(\mathbf{Ac})^2 - 4\mathbf{Ac}^3$

$e_{i1}(z)$ получаем также и при разложении локальной ошибки численного решения уравнения (1.3) в ряд Тейлора. В [20]–[24] предлагались методы, удовлетворяющие условиям

$$e_{i1}(z) \equiv 0, \quad i = 1, \dots, \tilde{q}, \quad \tilde{q} \leq p,$$

при $\tilde{q} > q$. Значение \tilde{q} определено как слабый (weak) СП (CCП). Методы, удовлетворяющие в общем случае более строгим условиям

$$e_{ij}(z) \equiv 0, \quad i = 1, \dots, \bar{q}, \quad j = 1, \dots, n_i, \quad (1.4)$$

при $\bar{q} > q$, рассматривались в [2], [9]–[16], при этом значение \bar{q} называло псевдостадийным порядком (ПСП). Справедливо неравенство $q \leq \bar{q} \leq \tilde{q} \leq p$ (в [2], [16] доказано, что из (1.4) следует $p \geq \bar{q}$). Мы рассматриваем методы, имеющие \tilde{q} , $\bar{q} > q$, и исследуем их свойства в сравнении с методами, имеющими такое же, как \tilde{q} или \bar{q} , значение q . При построении таких методов удобно вместо условий $e_{ij}(z) \equiv 0$ использовать эквивалентные условия

$$\mathbf{b}^T \mathbf{A}^k \mathbf{d}_{ij} = 0, \quad k = 0, \dots, s-1; \quad 1 - i \mathbf{b}^T \mathbf{c}^{i-1} = 0, \quad (1.5)$$

а если метод жестко точный, то вместо (1.5) можно использовать условия

$$\mathbf{e}_s^T \mathbf{A}^k \mathbf{d}_{ij} = 0, \quad \mathbf{e}_s = (0, \dots, 0, 1)^T, \quad k = 0, \dots, s-1.$$

При $i \leq q$ имеем $e_{ij}(z) \equiv 0$, тогда соответствующие модельные уравнения решаются точно, а все функции $e_{q+1, j}(z)$ равны между собой. Поэтому если $\tilde{q} = q+1$, то $\bar{q} = \tilde{q}$. В этом случае поведение ошибки решения жестких задач соответствует более высокому (на 1) СП. Методы, имеющие $\tilde{q} > \bar{q}$, наиболее эффективны при решении линейных задач, но они могут быть заметно менее эффективными при решении нелинейных задач.

Часто уравнения бывают представлены не в нормальной форме Коши, а в виде системы ДАУ, содержащей как дифференциальные, так и алгебраические уравнения. Будем рассматривать ДАУ, представленные в полуявной форме (форме Хессенберга), т.е. в виде

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{z}), \quad \mathbf{0} = \mathbf{g}(\mathbf{y}, \mathbf{z}), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \quad \mathbf{z}(t_0) = \mathbf{z}_0.$$

Согласно приведенному в [5] определению, индекс дифференцирования системы ДАУ есть наименьшее число аналитических дифференцирований, требующихся для того, чтобы из исходных уравнений путем алгебраических преобразований можно было получить систему ОДУ в форме Коши. При этом каждое дифференцирование понижает индекс на 1.

Высокий СП важен и для эффективного решения ДАУ высших индексов (см. [2], [5], [11], [25]–[29]). Систему ДАУ индекса 2 (ДАУ2) можно представить в виде

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{z}), \quad \mathbf{0} = \mathbf{g}(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \quad \mathbf{z}(t_0) = \mathbf{z}_0,$$

где матрица $\mathbf{g}_y \mathbf{f}_z$ обратима в окрестности решения. Предполагаем, что начальные условия согласованы, т. е. удовлетворяют алгебраической части и уравнению $\mathbf{0} = \mathbf{g}_y \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{z})$, полученному в результате дифференцирования алгебраической части. Систему ДАУ индекса 3 (ДАУ3) можно представить в виде

$$\mathbf{y}' = \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{z}), \quad \mathbf{z}' = \mathbf{k}(\mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{u}), \quad \mathbf{0} = \mathbf{g}(\mathbf{y}), \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0, \quad \mathbf{z}(t_0) = \mathbf{z}_0, \quad \mathbf{u}(t_0) = \mathbf{u}_0,$$

где матрица $\mathbf{g}_y \mathbf{f}_z \mathbf{k}_u$ обратима в окрестности решения. Предполагаем, что начальные условия согласованы, т. е. удовлетворяют алгебраической части и уравнениям, полученным в результате однократного и двухкратного дифференцирования алгебраической части.

Предположим, что метод жестко точный и имеет обратимую матрицу \mathbf{A} . Сходимость решения ДАУ2 и ДАУ3 такими методами исследовалась в [5], [25], [26], где получены порядки сходимости для различных компонент. Аналогичные результаты получены в [27] для случая решения ДАУ2 жестко точными методами вида

$$\begin{array}{c|cc} 0 & 0 & \mathbf{0}^T \\ \tilde{\mathbf{c}} & \tilde{\mathbf{a}} & \tilde{\mathbf{A}} \\ \hline & b_1 & \tilde{\mathbf{b}} \end{array}, \quad (1.6)$$

где матрица $\tilde{\mathbf{A}}$ обратима (к таким методам относятся ESDIRK). В табл. 2 приведены порядки сходимости различных компонент ДАУ, полученные как следствия теорем из этих работ при $q = 1, 2, 3$. При наличии некоторых дополнительных условий порядки могут быть выше. Например, если выполняется упрощающее предположение $D(\zeta), \zeta \geq 1$, то значение p_y может быть больше, чем указано в табл. 2 (см. [26], [27]). Но для всех рассмотренных здесь методов это предположение не выполняется. Нам неизвестны теоретические результаты о сходимости методов вида (1.6) при решении ДАУ3, но численные эксперименты дают оценки порядков как в табл. 2.

Таблица 2. Порядки сходимости компонент ДАУ2 и ДАУ3

q	ДАУ2		ДАУ3		
	p_y	p_z	p_y	p_z	p_u
1	$\min(p, 2)$	1	—	—	—
2	$\min(p, 3)$	2	2	2	1
3	$\min(p, 4)$	3	3	3	2

В общем случае жестко точные методы, имеющие 1-й СП и обратимую матрицу \mathbf{A} , не обеспечивают сходимости при решении ДАУ3. В [2], [11] на основе модельных уравнений для ДАУ3 были получены необходимые условия сходимости таких методов:

$$\mathbf{e}_s^T \mathbf{A}^{-2} \mathbf{c}^2 = 2, \quad \mathbf{e}_s^T \mathbf{A}^{-2} \mathbf{c} = 0; \quad (1.7)$$

$$\mathbf{e}_s^T \mathbf{A}^{-2} \mathbf{c}^2 = 2, \quad \mathbf{b}^T (\mathbf{A}^{-2} \mathbf{c}^2)^j = 2^j, \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (1.8)$$

(необходимо выполнение (1.7) либо (1.8)). Численные эксперименты показали, что выполнение (1.7) либо (1.8) обеспечивает сходимость всех компонент с 1-м порядком, а для сходимости со 2-м порядком y - и z -компонент необходимо также выполнение условия

$$\mathbf{b}^T \mathbf{A} (\mathbf{A}^{-2} \mathbf{c}^2)^j = 2^{j-1}, \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (1.9)$$

В [2], [11], [29] были получены также и некоторые другие условия, необходимые для повышения порядков сходимости компонент ДАУ, но у нас нет доказательства, что эти условия (вместе с условиями порядка для ОДУ) также и достаточные.

Условия (1.8), (1.9) выполняются для методов 2-го СП, но 2-й ПСП не гарантирует их выполнения. В разд. 3 статьи рассмотрен квазистадийный порядок, который позволяет обеспечить выполнение этих и некоторых других условий сходимости численного решения ДАУ.

В статье рассмотрены однократно диагонально-нейевые, явные и обратные к явным методы, которые, имея 1-й СП, позволяют избежать снижения порядка при решении жестких задач. Эти методы имеют также повышенные порядки сходимости при решении ДАУ индексов 2 и 3. Для явных и обратных к ним методов мы приводим коэффициенты вложенной формулы. Условимся говорить, что метод имеет ПСП \bar{q} , если $\bar{q} = \bar{q} > q$. А если $\tilde{q} > \bar{q} > q$, то будем указывать значения ПСП и ССП (\bar{q} и \tilde{q}).

2. МЕТОДЫ SDIRK

При построении всех методов предполагаем, что они удовлетворяют условию 1-го СП: $\mathbf{A}\mathbf{e} = \mathbf{c}$. Жесткоточные методы SDIRK имеют таблицу Бутчера:

γ	γ					
c_2	a_{21}	γ				
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots			
c_{s-1}	$a_{s-1,1}$	$a_{s-1,2}$	\cdots	γ		
1	b_1	b_2	\cdots	b_{s-1}	γ	
	b_1	b_2	\cdots	b_{s-1}	γ	

Рассмотрим сначала методы, имеющие $p = \bar{q} = 2$. Для них должны выполняться условия

$$\mathbf{e}_s^T \mathbf{A}^i (\mathbf{c}^2 - 2\mathbf{A}\mathbf{c}) = 0, \quad i = 0, \dots, s-1. \quad (2.1)$$

Примем $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \gamma \mathbf{I}$, $\mathbf{I} = \text{diag}(\mathbf{e})$. Тогда условия (2.1) эквивалентны условиям

$$\mathbf{e}_s^T \bar{\mathbf{A}}^i (\mathbf{c}^2 - 2\mathbf{A}\mathbf{c}) = 0, \quad i = 0, \dots, s-1. \quad (2.2)$$

При $i = s-1$ получаем

$$\mathbf{e}_s^T \bar{\mathbf{A}}^{s-1} (\mathbf{c}^2 - 2\mathbf{A}\mathbf{c}) = -b_{s-1} a_{s-1,s-2} \cdots a_{21} \gamma^2 = 0, \quad (2.3)$$

откуда следует, что один из сомножителей в (2.3) должен быть равен 0. Это не может быть b_{s-1} или a_{21} , поскольку в этом случае одна из стадий становится лишней и ее можно исключить. Поэтому число стадий методов, удовлетворяющих условиям (2.2), должно быть не менее 4-х.

При $s = 4$ условия (2.2) могут быть выполнены, если только $\gamma = 1 \mp \sqrt{2}/2$ (как у 2-стадийного SDIRK 2-го порядка), при этом меньшее значение γ обеспечивает лучшую точность. При свободных коэффициентах c_2 и c_3 остальные коэффициенты находим по формулам

$$\begin{aligned} \gamma &= 1 \mp \frac{\sqrt{2}}{2}, \quad a_{32} = 0, \quad b_2 = \frac{\gamma^2 (1 - \gamma)}{(c_3 - \gamma)(c_3 - c_2)}, \quad b_3 = \frac{\gamma^2 (1 - \gamma)}{(c_2 - \gamma)(c_2 - c_3)}, \\ a_{21} &= c_2 - \gamma, \quad a_{31} = c_3 - \gamma, \quad b_1 = 1 - b_2 - b_3 - \gamma. \end{aligned}$$

Потребовав также выполнения условий (1.8), (1.9), получим метод

γ	γ					
0	$-\gamma$	γ				
2γ	γ	0	γ			
1	0	β	β	γ		
1	0	β	β	γ		

По своим свойствам он очень похож на метод TR-BDF2:

0	0					
2γ	γ	γ				
1	β	β	γ			
1	β	β	γ			

(см. [2], [30]). Оба метода имеют одинаковую функцию устойчивости и одинаковые коэффициенты погрешности 3-го порядка. Отличие в том, что метод (2.4) имеет обратимую матрицу \mathbf{A} и все его внутренние стадии L -устойчивы, тогда как 2-я стадия TR-BDF2 только A -устойчива. При решении жестких задач оба метода свободны от снижения порядка и показывают близкие результаты, а при решении ДАУ2 и ДАУ3 обеспечивают сходимость с порядками $p_y = p_z = 2$, $p_u = 1$.

При $s = 5$ можно построить метод 3-го порядка, имеющий $\bar{q} = 2$, если γ – корень многочлена $1 - 9z + 18z^2 - 6z^3$. Метод будет L -устойчивым, если $\gamma = 0.435866\dots$. При заданном γ такие методы образуют 4-параметрическое семейство со свободными коэффициентами c_2, c_3, c_4, b_4 . Остальные коэффициенты находим по формулам

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \gamma & c_2 & c_3 \\ \gamma^2 & c_2^2 & c_3^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 - b_4 - \gamma \\ 1/2 - b_4 c_4 - \gamma \\ 1/3 - b_4 c_4^2 - \gamma \end{bmatrix}, \quad a_{42} = \frac{\gamma^2 (1 - 4\gamma + 2\gamma^2)}{2b_4(c_2 - \gamma)(c_2 - c_3)}, \\ a_{43} &= a_{42} \frac{\gamma - c_2}{c_3 - \gamma}, \quad a_{32} = 0, \quad a_{21} = c_2 - \gamma, \quad a_{31} = c_3 - \gamma, \quad a_{41} = c_4 - a_{42} - a_{43} - \gamma. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Подбором c_2 и b_4 можно обеспечить 3-й ССП метода, тогда коэффициенты c_3 и c_4 остаются свободными. Мы задали их исходя из минимизации величины $\max |a_{ij}|$ при ограничениях $0 \leq c_i \leq 1$. В результате получили

$$c_3 = 1, \quad c_4 = 0, \quad c_2 = 4\gamma - c_3, \quad b_4 = \frac{2(1 - 8\gamma + 12\gamma^2) + 3c_2c_3(1 - 4\gamma + 2\gamma^2)}{6(c_4 - \gamma)(c_4 - c_2)(c_4 - c_3)}. \quad (2.6)$$

Метод, задаваемый формулами (2.5), (2.6), свободен от снижения порядка при решении линейных жестких задач, но при решении нелинейных задач возможно небольшое снижение порядка.

Метод (2.5), (2.6) не обеспечивает сходимости при решении ДАУЗ, поскольку условия (1.8), (1.9) не выполняются. Эти условия будут выполняться, если задать $c_2 = 0$, $c_3 = 2\gamma$ и выбрать b_4 из условия $b_1 = 0$. Коэффициент c_4 задаем таким, чтобы выполнялось первое из условий

$$\mathbf{b}^T(\mathbf{c}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{c}^2 - 2\mathbf{Ac})) = 2/3, \quad \mathbf{b}^T(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{c}^2 - 2\mathbf{Ac})^2 = 4/3, \quad (2.7)$$

необходимых для сходимости укомпоненты ДАУ2 с 3-м порядком (см. [2], [11], [29]). В результате получен метод 2-го ПСП с коэффициентами (2.5),

$$c_2 = 0, \quad c_3 = 2\gamma, \quad c_4 = \frac{2 - 9\gamma + 6\gamma^2}{3(1 - 4\gamma + 2\gamma^2)}, \quad b_4 = \frac{1 - 6\gamma + 6\gamma^2}{3c_4(c_4 - 2\gamma)}, \quad (2.8)$$

который можно использовать для решения ДАУ3. Численные эксперименты показали, что при решении ДАУЗ он обеспечивает сходимость с порядками $p_y = p_z = 2$, $p_u = 1$ (такими же, как и методы 2-го СП). При решении ДАУ2 также получаем $p_y = p_z = 2$, хотя методы 2-го СП при $p \geq 3$ обеспечивают $p_y = 3$. Этот факт объясняется невыполнением 2-го условия в (2.7).

Таким образом, повышение ПСП приводит к эффекту, аналогичному повышению СП при решении жестких ОДУ, но для решения ДАУ2 и ДАУЗ необходимо выполнение дополнительных условий. Нам не удалось построить метод SDIRK, обладающий всеми свойствами методов 3-го СП. Методы ESDIRK 2-го СП с такими свойствами были построены в [2], [15]. В этой статье мы специально ограничились рассмотрением методов 1-го СП, для которых проще и удобнее показать основные принципы построения методов повышенного ПСП.

3. КВАЗИСТАДИЙНЫЙ ПОРЯДОК

В [31] было введено понятие квазистадийного порядка (КСП), согласно которому метод имеет прямой (forward) КСП \hat{q} , если при $q \geq 1$ выполняются условия

$$\mathbf{b}(\mathbf{c}^i - i\mathbf{Ac}^{i-1}) = (0, \dots, 0)^T, \quad i = 2, \dots, \hat{q}, \quad (3.1)$$

и обратный (inverse) КСП \hat{q} при выполнении условий

$$\mathbf{b}(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{c}^i - i\mathbf{c}^{i-1}) = (0, \dots, 0)^T, \quad i = 2, \dots, \hat{q} \quad (3.2)$$

(умножение векторов выполняем покомпонентно). Эти условия означают, что если $b_j \neq 0$, то j -й компонент вектора в скобках равен 0. Повышенный ($\hat{q} > 1$) прямой КСП обычно используется в явных методах Рунге–Кутты высоких порядков, упрощая их построение. Например, метод Дорманда–Принса 5-го порядка имеет 3-й прямой КСП. В [31] построен 4-стадийный метод SDIRK 3-го порядка, удовлетворяющий условиям (3.1), (3.2) при $\hat{q} = 2$.

В [2], [11], [29] на основе модельных уравнений были получены необходимые условия для повышения p_y , p_z на 1 при решении ДАУ2 методами 1-го СП. При выполнении условий (3.1), (3.2) для $\hat{q} = 2$ эти условия также будут выполняться. Эксперименты показали, что метод из [31] действительно обеспечивает сходимость как у методов 2-го СП при решении ДАУ2, но при решении ДАУЗ сходимость отсутствует.

На основе условий, аналогичных (3.1), (3.2), рассмотрим построение методов SDIRK 3-го порядка, которые обеспечивают сходимость как у методов 2-го СП также и для ДАУЗ. Для этого потребуем выполнения условий

$$\mathbf{b}(\mathbf{A}^k\mathbf{c}^2 - 2\mathbf{A}^{k+1}\mathbf{c}) = (0, \dots, 0)^T, \quad k = 0, -1, -2; \quad (3.3a)$$

$$1 - 3\mathbf{b}^T\mathbf{c}^2 = 0. \quad (3.3b)$$

Условия (3.3a) можно рассматривать как обобщение условий 2-го КСП для ДАУЗ. При $k = 0$ условия (3.3) обеспечивают 3-й порядок метода. При $k = -1$ обеспечиваются условия (2.7), а при $k = -2$ – условия (1.8). Для обеспечения 2-го порядка y - и z -компонент ДАУЗ дополнительно необходимо выполнение условий (1.9).

При $s = 5$ мы нашли пять методов SDIRK, удовлетворяющих условиям (3.3), (1.9), все они имеют $\gamma = 1/4$, $c_4 = 1/3$, $\mathbf{b} = (0, 0, 0, 3/4, 1/4)^T$. По результатам экспериментов мы убедились, что эти методы обеспечивают такие же порядки сходимости компонент ДАУ2 и ДАУ3, как методы 2-го СП. Приводим один из них, который является L -устойчивым и имеет малые значения коэффициентов ($\max |a_{ij}| = 0.75$):

$$\begin{array}{c|ccccc}
 1/4 & 1/4 & & & & \\
 1/2 & & 1/4 & 1/4 & & \\
 31/40 & 63/400 & 147/400 & & 1/4 & \\
 1/3 & 25/189 & 1/12 & -25/189 & 1/4 & \\
 1 & 0 & 0 & 0 & 3/4 & 1/4 \\
 \hline
 & 0 & 0 & 0 & 3/4 & 1/4
 \end{array} \tag{3.4}$$

Более значимых результатов удалось добиться для жестко точных методов ESDIRK, таблица Бутчера которых имеет вид (1.6). Такие методы имеют 2-й СП, а условия 3-го КСП для ДАУЗ запишутся в виде

$$\tilde{\mathbf{b}} \left(\tilde{\mathbf{A}}^k \tilde{\mathbf{c}}^3 - 3\tilde{\mathbf{A}}^{k-1} \tilde{\mathbf{c}}^2 \right) = (0, \dots, 0)^T, \quad k = 0, -1, -2. \quad (3.5)$$

На этот раз выполнение (3.5) гарантирует также и выполнение условий

$$\tilde{\mathbf{b}}^T \tilde{\mathbf{A}}^{-2} \tilde{\mathbf{c}}^3 = 3, \quad \tilde{\mathbf{b}}^T \tilde{\mathbf{A}}^{-3} \tilde{\mathbf{c}}^3 = 6, \quad \tilde{\mathbf{b}}^T \left(\tilde{\mathbf{c}} \left(\tilde{\mathbf{A}}^{-2} \tilde{\mathbf{c}}^3 \right) \right) = 2, \quad \tilde{\mathbf{b}}^T \left(\tilde{\mathbf{A}}^{-2} \tilde{\mathbf{c}}^3 \right)^2 = 12, \quad \tilde{\mathbf{b}}^T \left(\tilde{\mathbf{c}} \left(\tilde{\mathbf{A}}^{-1} \tilde{\mathbf{c}}^3 \right) \right) = 3/4,$$

необходимых (наряду с условиями классического порядка) для обеспечения таких же порядков сходимости компонент ДАУ2 и ДАУ3, как у методов 3-го СП. В [2], [29] рассмотрено 1параметрическое семейство бстадийных методов ESDIRK 4-го порядка, удовлетворяющих условиям (3.5). Там же приведены результаты решения тестовых задач, подтверждающие заявленные порядки сходимости.

4. ЯВНЫЕ МЕТОДЫ

Классические явные методы малопригодны для решения жестких задач, но они могут успешно решать умеренно жесткие задачи. В настоящее время известны также специальные явные методы, которые позволяют эффективно решать задачи с вещественным жестким спектром матрицы Якоби. К ним относятся стабилизованные методы с расширенными областями устойчивости (см. [2], [5], [12], [32], [33]), а также аддитивные нелинейные методы, осуществляющие самонастройку расчетной схемы на основе полученных на предварительных стадиях оценок больших по модулю собственных чисел матрицы Якоби (см. [2], [13]).

Явные методы Рунге–Кутты имеют только 1-й СП, что затрудняет построение методов повышенной точности для жестких и умеренно жестких задач. Но можно повысить точность, используя методы, обладающие свойствами методов более высокого СП. Впервые явные методы Рунге–Кутты, имеющие повышенный ПСП ($\bar{q} = 2, 3$), были предложены в [9]. На их основе в [2], [12], [13], [15] построены явные стабилизированные и адаптивные методы 3-го и 4-го порядков. В [23] построены явные методы, имеющие значения p и \bar{q} вплоть до 5, но при этом $\bar{q} = 2$.

Построение методов, имеющих $\tilde{q} > 1$, основано на соотношениях

$$\mathbf{b}^T \mathbf{A}^k (\mathbf{c}^i - i \mathbf{A} \mathbf{c}^{i-1}) = 0 \quad \text{при } k < p - i, \quad (4.1a)$$

$$\mathbf{b}^T \mathbf{A}^l \mathbf{c}^j = 0 \quad \text{при } l > s - 2, \quad (4.16)$$

где (4.1а) следует из условий порядка, а (4.1б) – из структуры А и с. Из (1.5), (4.1) следует, что методы, имеющие $\tilde{q} > 1$, должны удовлетворять условиям

$$\mathbf{b}^T \mathbf{A}^k (\mathbf{c}^i - \mathbf{A} \mathbf{c}^{i-1}) = 0, \quad k = p-i, \dots, s-2, \quad i = 1, \dots, \tilde{q}. \quad (4.2)$$

Найдем минимальное число стадий, необходимое (но необязательно достаточное) для построения метода порядка p при $\tilde{q} = \bar{q} = 2$. При $s = p$ таких методов нет, поскольку $\mathbf{b}^T \mathbf{A}^{s-2} (\mathbf{c}^2 - 2\mathbf{A}\mathbf{c}) = c_2 / p! \neq 0$. При $s = p + 1$ из (4.2) получаем условия

$$\mathbf{b}^T \mathbf{A}^k (\mathbf{c}^2 - \mathbf{A}\mathbf{c}) = 0, \quad k = s-3, s-2.$$

С учетом (4.16) эти условия запишутся в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^T \mathbf{A}^{s-3} (\mathbf{c}^2 - 2\mathbf{A}\mathbf{c}) &= \mathbf{b}^T \mathbf{A}^{s-3} \mathbf{c}^2 = b_{s-1} a_{s-1, s-2} \cdots a_{32} c_2^2 + b_s a_{s, s-1} \cdots a_{54} (a_{42} c_2^2 + a_{43} c_3^2) = 0, \\ \mathbf{b}^T \mathbf{A}^{s-2} (\mathbf{c}^2 - 2\mathbf{A}\mathbf{c}) &= \mathbf{b}^T \mathbf{A}^{s-2} \mathbf{c}^2 = b_s a_{s, s-1} \cdots a_{32} c_2^2 = 0. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Учтем также одно из условий порядка $p = s - 1$:

$$\mathbf{b}^T \mathbf{A}^{s-3} \mathbf{c} = b_{s-1} a_{s-1, s-2} \cdots a_{32} c_2 + b_s a_{s, s-1} \cdots a_{54} (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) = 1/p! \neq 0. \quad (4.4)$$

Из (4.3), (4.4) видно, что эти условия будут выполняться, только если

$$a_{32} = 0, \quad a_{42} c_2^2 + a_{43} c_3^2 = 0 \quad (4.5)$$

(при $s = 3$ принимаем $a_{42} = b_2$, $a_{43} = b_3$). В [9] приведены методы порядков 3, 4 и 5, имеющие $s = p + 1$, $\bar{q} = 2$.

Рассмотрим построение методов, имеющих заданные значения s , p и \bar{q} . В [23] доказано, что ССП таких методов удовлетворяет неравенству $\bar{q} \leq s - p + 1$, а при $\bar{q} = s - p + 1$ функция устойчивости метода имеет вид $R(z) = 1 + z + \cdots + z^p/p!$. В [23] приведены также некоторые варианты структуры матрицы \mathbf{A} при заданном \bar{q} . Мы используем структуру, основанную на выполнении равенств

$$\begin{aligned} a_{ij} &= 0, \quad i = 3, \dots, \bar{q} + 1, \quad j = 2, \dots, i - 1, \\ \sum_{j=2}^{i-1} a_{ij} c_j^k &= 0, \quad i = \bar{q} + 2, \dots, \bar{q} + k, \quad k = 2, \dots, \bar{q} \end{aligned} \quad (4.6)$$

(если $i = s + 1$, то принимаем $a_{ij} = b_j$). При $\bar{q} > 2$ построенный на основе (4.6) метод в общем случае имеет $\bar{q} < \bar{q}$. Чтобы повысить значение \bar{q} , следует обеспечить выполнение некоторых дополнительных условий.

Рассмотрим сначала построение метода, имеющего $p = s - 1 = 3$ и $\bar{q} = 2$. В этом случае, кроме (4.5), должны выполняться условия 3-го порядка:

$$b_2 c_2 + b_3 c_3 + b_4 c_4 = 1/2, \quad b_2 c_2^2 + b_3 c_3^2 + b_4 c_4^2 = 1/3, \quad b_4 (a_{42} c_2 + a_{43} c_3) = 1/6. \quad (4.7)$$

При свободных коэффициентах c_2, c_3, c_4, b_4 коэффициенты a_{42}, a_{43}, b_2, b_3 находим из (4.5), (4.7), а коэффициенты a_{i1}, b_1 находим из условия 1-го СП.

Построим два метода, удовлетворяющих (4.5), (4.7). В первом из них потребуем, чтобы метод имел вложенную формулу 2-го порядка, совпадающую с 4-й стадией и имеющую $\bar{q} = 2$. Тогда к условиям (4.7) добавляются соотношения $c_4 = 1$, $a_{42} c_2 + a_{43} c_3 = 1/2$, откуда, учитывая (4.7), получаем $b_4 = 1/3$. Исходя из условия минимизации коэффициентов погрешности, принимаем также $c_2 = 1/2$, $c_3 = 1$, тогда $e(T_{4i}) = (0, -1/3, 1, 1)$. В результате получен метод

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \hline 1/2 & 1/2 & & \\ 1 & 1 & 0 & \\ 1 & -1/2 & 2 & -1/2 \\ \hline b_i & 1/6 & 2/3 & -1/6 & 1/3 \\ \hat{b}_i & -1/2 & 2 & -1/2 & 0 \end{array}. \quad (4.8)$$

Если принять $c_4 = 0$, то получим метод

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & & & \\ \hline 1/2 & 1/2 & & \\ 1 & 1 & 0 & \\ 0 & -3/2 & 2 & -1/2 \\ \hline b_i & -1/6 & 2/3 & 1/6 & 1/3 \\ \hat{b}_i & -1/2 & 2 & -1/2 & 0 \end{array}, \quad (4.9)$$

имеющий $e_{32}(z) \equiv 0$ и $e(T_{4i}) = (0, 1, 1, 1)$. Т. е. выполняется условие (1.5) 3-го ПСП ($i = 3$) для $j = 2$ (но не для $j = 1$). Благодаря этому метод (4.9) может иметь преимущество по сравнению с (4.8) при решении нелинейных задач.

Рассмотрим теперь методы, имеющие $p = \bar{q} = 3$. В этом случае минимальное число стадий $s = p + 2 = 5$. Такие методы имеют свободные коэффициенты c_2, c_3, c_4, b_5 , а остальные коэффициенты находим по формулам

$$\begin{aligned} a_{32} = a_{42} = a_{43} &= 0, \quad c_5 = 0, \\ \begin{bmatrix} a_{52} \\ a_{53} \\ a_{54} \end{bmatrix} &= \mathbf{C}^{-1} \begin{bmatrix} 1/(6b_5) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \mathbf{C}^{-1} \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/3 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_2 & c_3 & c_4 \\ c_2^2 & c_3^2 & c_4^2 \\ c_2^3 & c_3^3 & c_4^3 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.10)$$

и из условия 1-го СП. Приняв $c_2 = 1/3$, $c_3 = 2/3$, $c_4 = b_5 = 1$, получим метод

$$\begin{array}{c|ccccc} 0 & & & & & \\ \hline 1/3 & 1/3 & & & & \\ 2/3 & 2/3 & 0 & & & \\ 1 & 1 & 0 & 0 & & \\ 0 & -11/12 & 3/2 & -3/4 & 1/6 & \\ \hline b_i & 1/4 & -3 & 15/4 & -1 & 1 \\ \hat{b}_i & 1/12 & -7/4 & 9/2 & 1/2 & 0 \end{array} . \quad (4.11)$$

Этот метод имеет $e(T_{4i}) = (1, 1, 1, 1)$.

Повысим порядок метода до 4-го при $\bar{q} = 3$, тогда $s = p + 2 = 6$. При свободных коэффициентах $c_2, c_3, c_4, c_6, a_{65}, b_6$ остальные коэффициенты вычисляем по формулам

$$\begin{aligned} a_{32} = a_{42} = a_{43} = 0, \quad c_5 = 0, \quad b_5 = b_6 a_{65} (4 - 3/c_6), \\ \begin{bmatrix} a_{52} \\ a_{53} \\ a_{54} \end{bmatrix} = \mathbf{C}^{-1} \begin{bmatrix} 1/(24b_6 a_{65}) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} a_{62} \\ a_{63} \\ a_{64} \end{bmatrix} = \mathbf{C}^{-1} \begin{bmatrix} 1/(8b_6 c_6) \\ 1/(12b_6) \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \mathbf{C}^{-1} \begin{bmatrix} 1/2 - b_6 c_6 \\ 1/3 - b_6 c_6^2 \\ 1/4 - b_6 c_6^3 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

где матрица \mathbf{C} такая же, как в (4.10). Приведем один из методов этого семейства:

$$\begin{array}{c|cccccc} 0 & & & & & & & \\ \hline 1/3 & 1/3 & & & & & & \\ 2/3 & 2/3 & 0 & & & & & \\ 1 & 1 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & -11/12 & 3/2 & -3/4 & 1/6 & & & \\ 1 & 1/4 & -3 & 15/4 & -1 & 1 & & \\ \hline b_i & -1/8 & 3/8 & 3/8 & -1/8 & 1/4 & 1/4 & \\ \hat{b}_i & 1/4 & -3 & 15/4 & -1 & 1 & 0 & \end{array} . \quad (4.13)$$

Отметим, что вложенный метод в (4.13) совпадает с основным методом в (4.11).

Наконец, при $s = 7$ построим метод 4-го порядка, имеющий $\bar{q} = 3, \tilde{q} = 4$ (значения $\bar{q} = 4$ нам добиться не удалось). В этом случае свободными являются коэффициенты $c_2, c_3, c_4, c_5, c_7, a_{76}, b_7$, а остальные коэффициенты вычисляем по формулам

$$\begin{aligned} a_{32} = a_{42} = a_{43} = a_{52} = a_{53} = a_{54} = 0, \quad c_6 = 0, \quad b_6 = b_7 a_{76} (4 - 3/c_7), \\ \begin{bmatrix} a_{62} \\ a_{63} \\ a_{64} \\ a_{65} \end{bmatrix} = \bar{\mathbf{C}}^{-1} \begin{bmatrix} 1/(24b_7 a_{76}) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} a_{72} \\ a_{73} \\ a_{74} \\ a_{75} \end{bmatrix} = \bar{\mathbf{C}}^{-1} \begin{bmatrix} 1/(8b_7 c_7) \\ 1/(12b_7) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \end{bmatrix} = \bar{\mathbf{C}}^{-1} \begin{bmatrix} 1/2 - b_7 c_7 \\ 1/3 - b_7 c_7^2 \\ 1/4 - b_7 c_7^3 \\ -b_7 c_7^4 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\bar{\mathbf{C}} = [c_{ij}], \quad c_{ij} = c_{j+1}^i, \quad i, j = 1, \dots, 4.$$

При любых допустимых значениях свободных коэффициентов полученного метода все элементы векторов $\mathbf{d}_{21}, \mathbf{d}_{31}, \mathbf{d}_{32}, \mathbf{d}_{41}$ из табл. 1 равны 0, а ненулевые элементы векторов $\mathbf{d}_{42}, \dots, \mathbf{d}_{45}$ имеют следующие значения:

$$d_{421} = d_{431} = d_{441} = c_7/4, \quad d_{451} = \frac{c_7(4c_7 - 3) + 9a_{76}}{144b_7c_7^2a_{76}}, \quad d_{452} = \frac{1}{144b_7a_{76}}.$$

Выбрав $a_{76} = c_7(3 - 4c_7)/9$, мы обнулим d_{451} . Уменьшая c_7 и увеличивая b_7 , можно добиться сколь угодно малых значений оставшихся ненулевых элементов, но при этом получаем очень большие коэффициенты метода, что недопустимо. Поэтому мы задали компромиссные значения $c_7 = 1/8, b_7 = 8$. В результате получен метод

$$\begin{array}{c|cccccc} 0 & & & & & & & \\ \hline 1/4 & 1/4 & & & & & & \\ 1/2 & 1/2 & 0 & & & & & \\ 3/4 & 3/4 & 0 & 0 & & & & \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & -5/4 & 12/5 & -9/5 & 4/5 & -3/20 & & \\ 1/8 & -17/24 & 23/18 & -17/24 & 5/18 & -7/144 & 5/144 & \\ \hline b_i & 21/16 & 5/36 & -199/24 & 257/36 & -251/144 & -50/9 & 8 \\ \hat{b}_i & 7/2 & -136/9 & 58/3 & -88/9 & 35/18 & 10/9 & 0 \end{array} . \quad (4.15)$$

Полученные методы позволяют обеспечить плотную выдачу (dense output) результатов в промежуточных точках с порядком аппроксимации, совпадающим с порядком метода. Для плотной выдачи используем формулу

$$\mathbf{y}(t_0 + \theta h) = \mathbf{y}_0 + h \sum_{i=1}^s \beta_i(\theta) \mathbf{F}_i. \quad (4.16)$$

Условия порядка p этой формулы запишутся в виде

$$[\beta_1(\theta), \dots, \beta_s(\theta)] \Phi(T_{ij}) = \theta^i / \gamma(T_{ij}), \quad i = 1, \dots, p, \quad j = 1, \dots, v_i, \quad (4.17)$$

где v_i – число различных корневых деревьев порядка i . На основе этих соотношений можно получить линейные алгебраические уравнения относительно $\beta_i(\theta)$, решая которые, находим искомые зависимости в виде многочленов от θ . Приведем формулы расчета $\beta_i(\theta)$ для рассмотренных методов, при этом принимаем $\beta_1(\theta) = 0 = \beta_2(\theta) = \dots = \beta_s(\theta)$.

Для семейства 4-стадийных методов 3-го порядка, задаваемого формулами (4.5), (4.7), получаем:

$$\beta_4(\theta) = \theta^3 b_4, \quad \begin{bmatrix} \beta_2(\theta) \\ \beta_3(\theta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_2 & c_3 \\ c_2^2 & c_3^2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \theta^2/2 - \beta_4(\theta) c_4 \\ \theta^3/3 - \beta_4(\theta) c_4^2 \end{bmatrix}. \quad (4.18)$$

Для методов, задаваемых формулами (4.10):

$$\beta_5(\theta) = \theta^3 b_5, \quad \begin{bmatrix} \beta_2(\theta) \\ \beta_3(\theta) \\ \beta_4(\theta) \end{bmatrix} = \mathbf{C}^{-1} \begin{bmatrix} \theta^2/2 \\ \theta^3/3 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.19)$$

Для методов, задаваемых формулами (4.12):

$$\beta_6(\theta) = \theta^4 b_6, \quad \beta_5(\theta) = \theta^3 b_6 a_{65} (4 - 3\theta/c_6), \quad \begin{bmatrix} \beta_2(\theta) \\ \beta_3(\theta) \\ \beta_4(\theta) \end{bmatrix} = \mathbf{C}^{-1} \begin{bmatrix} \theta^2/2 - \beta_6(\theta) c_6 \\ \theta^3/3 - \beta_6(\theta) c_6^2 \\ \theta^4/4 - \beta_6(\theta) c_6^3 \end{bmatrix}. \quad (4.20)$$

Для методов, задаваемых формулами (4.14):

$$\beta_7(\theta) = \theta^4 b_7, \quad \beta_6(\theta) = \theta^3 b_7 a_{76} (4 - 3\theta/c_7), \quad \begin{bmatrix} \beta_2(\theta) \\ \beta_3(\theta) \\ \beta_4(\theta) \\ \beta_5(\theta) \end{bmatrix} = \bar{\mathbf{C}}^{-1} \begin{bmatrix} \theta^2/2 - \beta_7(\theta) c_7 \\ \theta^3/3 - \beta_7(\theta) c_7^2 \\ \theta^4/4 - \beta_7(\theta) c_7^3 \\ -\beta_7(\theta) c_7^4 \end{bmatrix}. \quad (4.21)$$

Среди рассмотренных методов особый интерес представляют методы (4.8) и (4.13), в которых вложенная формула совпадает с последней стадией. В [8] был предложен способ построения явных стабилизованных методов с расширенными областями устойчивости, основанный на методах такого типа. В [2], [12] на основе этих методов построены стабилизированные методы 3-го и 4-го порядков, имеющие ПСП 2 и 3.

5. МЕТОДЫ, ОБРАТНЫЕ К ЯВНЫМ МЕТОДАМ

Обратный метод для метода (1.1) получим, поменяв местами \mathbf{y}_0 и \mathbf{y}_1 , заменив h на $-h$, а затем вместо t_0 подставив $t_0 + h$. Обратный метод обладает тем свойством, что если сделать один шаг прямого метода в соответствии с (1.1), а затем сделать шаг обратным методом в обратном направлении (поменяв h на $-h$), то получим исходный вектор \mathbf{y}_0 . Отметим, что термин обратный (inverse), используемый для обозначения таких методов в [34] и некоторых других работах, не является общепринятым. Наряду с ним используют термин присоединенный (adjoint) [1] и отраженный (reflected) [6]. В [1], [6] изложены основные свойства обратных методов, из которых следует, что порядок, СП, ССП и ПСП обратного метода совпадают с одноименными значениями исходного метода, а главный член погрешности отличается множителем $(-1)^p$.

В [34] было предложено использовать обратные к явным методам Рунге–Кутты для решения жестких задач. Такие методы обладают рядом полезных свойств. Они жестко точные, удобны для реализации, поскольку являются мононеявыми, и имеют высокий порядок L -затухания (согласно [35], метод имеет порядок L -затухания μ , если $R(z) = O(z^{-\mu})$ при $z \rightarrow \infty$). В то же время эти методы имеют существенный недостаток – 1-й СП, что приводит к снижению точности и реального порядка при решении жестких и дифференциально-алгебраических уравнений. Использование методов с повышенными значениями ПСП и ССП позволяет избавиться от этого недостатка.

Пусть a_{ij} , b_j , c_i – коэффициенты явного s -стадийного метода Рунге–Кутты. Тогда формулы обратного метода запишутся в виде

$$\mathbf{F}_i = \mathbf{f} \left(t_0 + (1 - c_i) h, \mathbf{y}_1 - h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \mathbf{F}_j \right), \quad i = 1, \dots, s, \quad \mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + h \sum_{i=1}^s b_i \mathbf{F}_i. \quad (5.1)$$

Зная \mathbf{y}_1 , можно найти все значения \mathbf{F}_i непосредственно по формулам (5.1). Это позволяет свести систему алгебраических уравнений (5.1) к уравнению относительно только вектора \mathbf{y}_1 , что обеспечивает эффективную реализацию метода. В [36] такие методы были названы мононеявными (они рассматривались также в [2], [14], [37], [38]). Реализация методов, обратных к явным методам, обсуждалась в [14], [34].

Полученные в результате обращения неявные методы позволяют задать хорошее начальное приближение для итераций при решении алгебраических уравнений (5.1). Формулы (4.16)–(4.21) справедливы также и для обратных методов, поэтому их можно использовать не только для плотной выдачи, но и для прогноза решения на следующем шаге. Пусть выполнен очередной шаг $\mathbf{y}_0 \rightarrow \mathbf{y}_1$ размером h , а размер следующего шага выбран равным wh . Тогда прогноз решения на следующем шаге можно получить по формуле (4.16), где $\theta = 1 + w$, при этом порядок прогноза совпадает с порядком метода. На первом шаге в качестве прогноза можно использовать явный метод с достаточно малым размером шага.

При исследовании обратных методов бывает удобно иметь их коэффициенты в более привычном виде (как в таблице Бутчера). В таком случае коэффициенты обратных методов получаем в виде

$$c_i^* = 1 - c_{s+1-i}, \quad a_{ij}^* = b_{s+1-j} - a_{s+1-i, s+1-j}, \quad b_j^* = b_{s+1-j}.$$

6. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Все методы, которые мы исследовали, имеют 1-й СП. Примем следующие обозначения для методов: МЕТОД $s\bar{p}\bar{q}$, если $\tilde{q} = \bar{q}$, и МЕТОД $s\bar{p}\bar{q}(\tilde{q})$, если $\tilde{q} > \bar{q}$ (s – число стадий, p – порядок). Если $\tilde{q} = \bar{q} = 1$, то указываем только s и p . Через SDIRK33 обозначим жестко точный метод 3-го порядка из [39]. Через ERK33 обозначим явный метод 3-го порядка из [40] (он получен исходя из минимизации коэффициентов погрешности, и реализован во вложенной паре Богацки–Шампайна [41]). Через ERK44 обозначим классический явный метод Рунге–Кутты. Рассмотренные в этой статье методы обозначим в виде (приводим номера формул):

SDIRK532 – (2.5), (2.8)	ERK432b – (4.9)
SDIRK532(3) – (2.5), (2.6)	ERK533 – (4.11)
SDIRK53 – (3.4)	ERK643 – (4.13)
ERK432 – (4.8)	ERK743(4) – (4.15)

Названия обратных к явным методам начинаем с буквы I (IERNK432 и т. д.).

Исследуем влияние жесткости системы ОДУ на точность численного решения. Для этого используем две задачи: нелинейную и линейную. Нелинейная задача (задача Капса) задается уравнениями

$$\begin{aligned} y'_1 &= -(\mu + 2)y_1 + \mu y_2^2, \quad y_1(0) = 1, \\ y'_2 &= y_1 - y_2 - y_2^2, \quad y_2(0) = 1, \quad 0 \leq t \leq 1, \end{aligned} \quad (6.1)$$

и имеет точное решение $y_1(t) = \exp(-2t)$, $y_2(t) = \exp(-t)$. Собственные числа матрицы Якоби мало изменяются на траектории решения и при больших μ в начальной точке примерно равны $-(\mu + 4)$ и -1 .

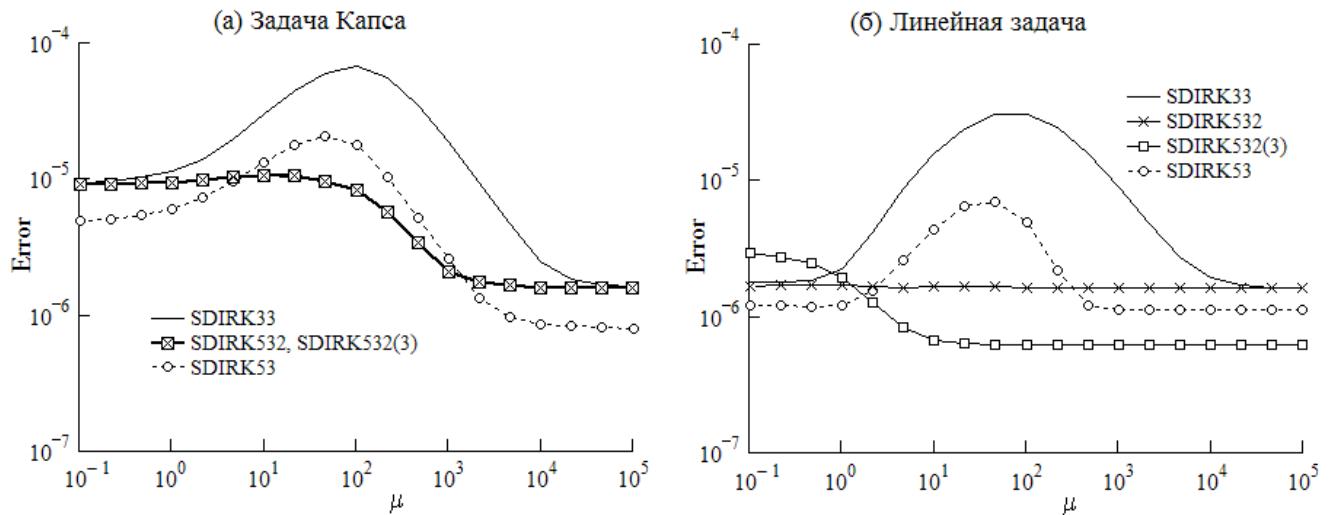
Линейная задача записывается в виде

$$\begin{bmatrix} y'_1 \\ y'_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ b & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 - \sin(t) \\ y_2 - \cos(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \cos(t) \\ -\sin(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y}(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (6.2)$$

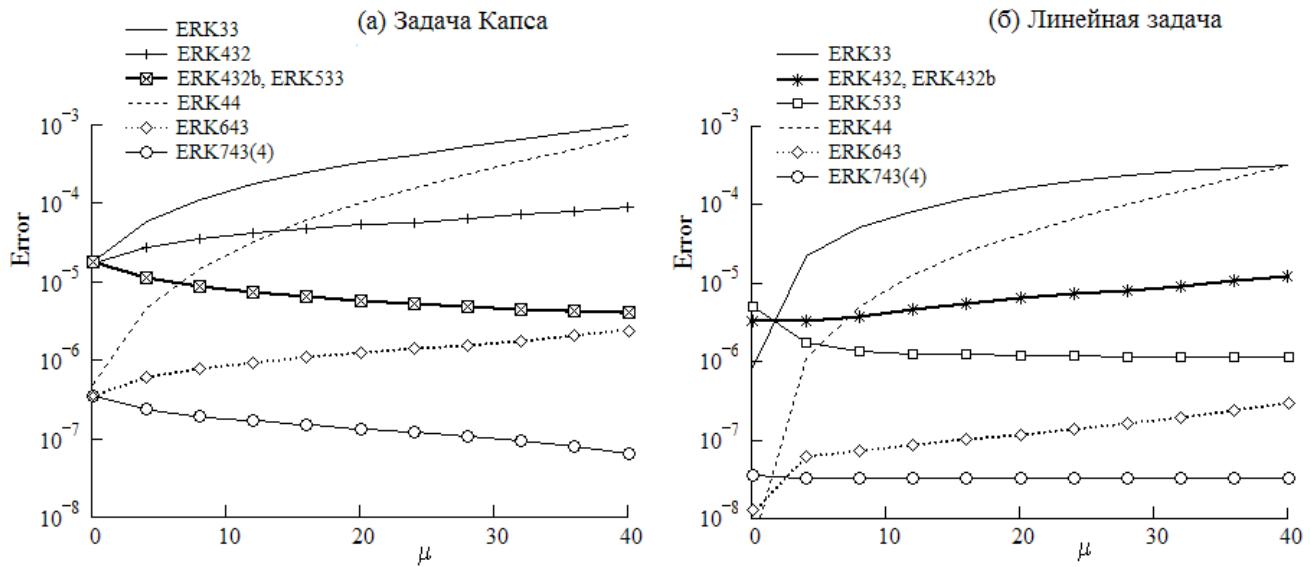
$$a = -(\mu + 1)/2, \quad b = -(\mu - 1)/2, \quad 0 \leq t \leq 1.$$

Она имеет решение $y_1(t) = \sin(t)$, $y_2(t) = \cos(t)$, а собственные числа матрицы Якоби равны $-\mu$ и -1 .

Обе задачи решались с размером шага $h = 1/20$. В каждой точке решения вычисляли евклидову норму ошибки, а в качестве ошибки решения задачи принимали максимальную среди этих норм. Зависимости ошибки от показателя жесткости μ приведены на фиг. 1–3. Интервал значений μ для явных методов выбран таким, чтобы все методы были устойчивы.



Фиг. 1. Зависимости ошибки от показателя жесткости для методов SDIRK.

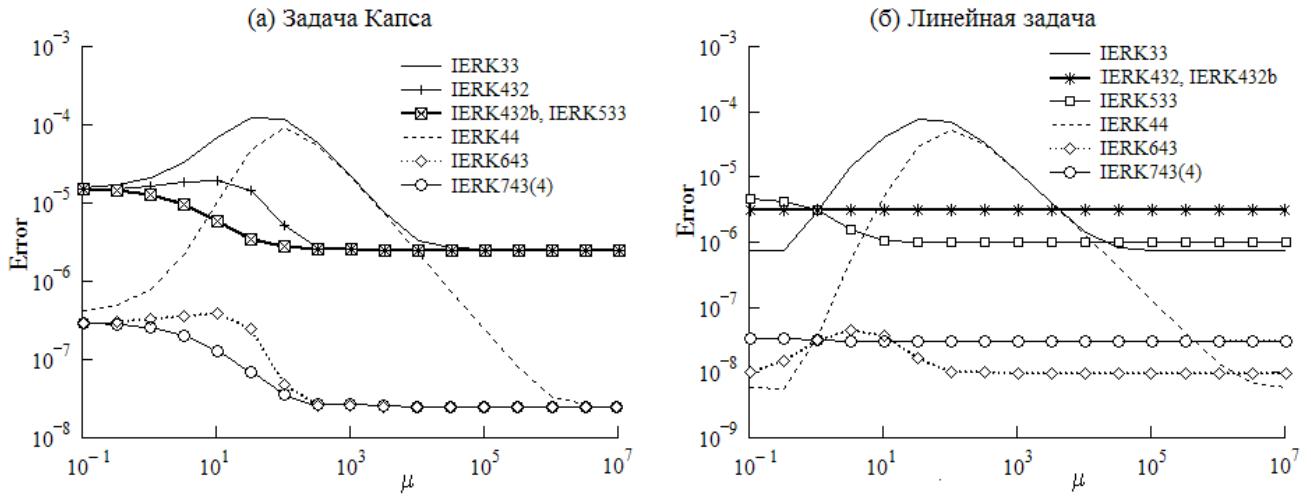


Фиг. 2. Зависимости ошибки от показателя жесткости для явных методов.

Снижение порядка неявных методов SDIRK33, SDIRK53, IERK33, IERK44 проявляется как заметное увеличение ошибки при умеренных значениях μ . Оценка порядка метода на таких участках снижается практически до $q = 1$ (см. [2], [14], [15]). При дальнейшем увеличении μ ошибка уменьшается, что объясняется жесткой точностью методов. Другие неявные методы имеют $p - \bar{q} \leq 1$, поэтому снижение точности и порядка невелико или совсем отсутствует. Явные методы ERK33 и ERK44 демонстрируют заметное снижение точности при увеличении μ , но при этом оценка порядка не уменьшается, а немножко увеличивается.

Приведенные на фиг. 1 результаты решения задачи Капса методами SDIRK532 и SDIRK532(3) практически совпадают, что можно объяснить доминированием нелинейной составляющей ошибки. Но при решении линейной жесткой задачи метод SDIRK532(3) демонстрирует заметное преимущество, поскольку имеет 3-й ССП ($e31(z) \equiv 0$). Аналогичное замечание справедливо для методов ERK432b, ERK533 (фиг. 2) и методов IERK432b, IERK533 (фиг. 3).

Практически совпадают также приведенные на фиг. 2 результаты решения линейной задачи методами ERK432 и ERK432b. Отличие этих методов в том, что ERK432 имеет $e32(z) \neq 0$, тогда как ERK432b имеет $e32(z) \equiv 0$. Функция $e32(z)$ описывает нелинейные составляющие ошибки, поэтому значения этой функции не влияют на решение линейных задач, что приводит к совпадению результатов. Но при решении нелинейной



Фиг. 3. Зависимости ошибки от показателя жесткости для методов IERK

задачи Капса метод ERK432b имеет преимущество. Все сказанное справедливо также для результатов методов IERK432 и IERK432b на фиг. 3.

Таким образом, жесткие модельные уравнения и полученные на их основе функции погрешности $e_{ij}(z)$ позволили объяснить поведение ошибки численного решения в тех случаях, когда никак иначе это поведение объяснить невозможно. Что касается поведения ошибки при малых значениях μ (нежесткие задачи), то оно вполне объяснимо с помощью коэффициентов погрешности.

Были также проведены эксперименты по исследованию сходимости различных компонент решения ДАУ. Для этого использовались тестовые задачи из [2], [26], [27], [42], [43]. Приведем результаты решения двух задач. Первая задача – ДАУ индекса 2 – взята из [27] и имеет вид

$$\begin{aligned} y'_1 &= y_1 y_2^2 z^2, \quad y'_2 = y_1^2 y_2^2 - 3y_2^2 z, \quad 0 = y_1^2 y_2 - 1, \\ y_1(0) &= y_2(0) = z(0) = 1, \quad 0 \leq t \leq 0.1. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Она имеет точное решение $y_1(t) = \exp(t)$, $y_2(t) = \exp(-2t)$, $z(t) = \exp(2t)$. Вторая задача – ДАУ индекса 3 – взята из [26] и имеет вид

$$\begin{aligned} y'_1 &= 2y_1 y_2 z_1 z_2, \quad y'_2 = -y_1 y_2 z_2^2, \quad z'_1 = (y_1 y_2 + z_1 z_2) u, \quad z'_2 = -y_1 y_2^2 z_2^3 u^2, \quad 0 = y_1 y_2^2 - 1, \\ y_1(0) &= y_2(0) = z_1(0) = z_2(0) = u(0) = 1, \quad 0 \leq t \leq 0.1. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Она имеет точное решение $y_1(t) = z_1(t) = \exp(2t)$, $y_2(t) = z_2(t) = \exp(-t)$, $u(t) = \exp(t)$.

Результаты решения задачи (6.3) приведены в табл. 3, а задачи (6.4) – в табл. 4, где через e_y , e_z и e_u обозначены ошибки решения соответствующих компонент при $h = 0.01$ (вычисляем их аналогично ошибкам решения ОДУ (6.1) и (6.2)). В табл. 3, 4 приведены также оценки порядков сходимости \tilde{p}_y , \tilde{p}_z , \tilde{p}_u соответствующих компонент, которые вычисляем по формуле

$$\tilde{p} = \frac{\ln(e(h)/e(h/2))}{\ln(2)},$$

где $e(h)$ – ошибка при размере шага h (размер шага последовательно уменьшаем до тех пор, пока искомая оценка практически не перестает изменяться). При решении некоторых других задач индексов 2 и 3 были получены более низкие оценки, чем для задач (6.3) и (6.4), которые приведены в скобках. Методы SDIRK33 и SDIRK532(3) не обеспечивают сходимости при решении ДАУ3, поэтому соответствующие результаты не приводим.

Рассмотрим результаты методов SDIRK. Метод SDIRK33 дает оценки порядков сходимости при решении ДАУ2, которые соответствуют теоретическим результатам в табл. 2. Оценки сходимости других методов SDIRK можно объяснить выполнением необходимых условий, рассмотренных в разд. 1–3 статьи (более подробно см. [2], [11], [29]).

Оценки сходимости методов IERK можно объяснить, если принять предположение, что метод, имеющий $q = 1$, $\bar{q} > 1$, обеспечивает такие же порядки сходимости, как метод, имеющий $q = \bar{q}$. При этом более высокие

Таблица 3. Результаты решения ДАУ индекса 2

Метод	e_y	e_z	\tilde{p}_y	\tilde{p}_z
SDIRK33	2.48×10^{-4}	1.27×10^{-2}	2	1
SDIRK532	4.78×10^{-5}	1.17×10^{-2}	2	2
SDIRK532(3)	7.11×10^{-5}	2.56×10^{-3}	2	2
SDIRK53	4.25×10^{-6}	1.40×10^{-3}	3	2
IERK432	7.03×10^{-7}	1.21×10^{-4}	3	2
IERK432b	3.84×10^{-6}	1.17×10^{-4}	3	2
IERK533	2.13×10^{-7}	2.63×10^{-7}	3	3
IERK643	2.82×10^{-9}	3.49×10^{-9}	4	4(3)
IERK743(4)	1.37×10^{-8}	1.69×10^{-8}	4	4

Таблица 4. Результаты решения ДАУ индекса 3

Метод	e_y	e_z	e_u	\tilde{p}_y	\tilde{p}_z	\tilde{p}_u
SDIRK532	7.55×10^{-6}	1.10×10^{-4}	2.75×10^{-2}	2	2	1
SDIRK53	3.33×10^{-6}	1.24×10^{-5}	4.35×10^{-2}	2	2	1
IERK432	2.11×10^{-7}	3.78×10^{-5}	1.78×10^{-4}	2	2	2(1)
IERK432b	2.15×10^{-7}	3.78×10^{-5}	8.10×10^{-3}	2	2	1
IERK533	6.24×10^{-8}	1.06×10^{-7}	2.04×10^{-5}	3	3	2
IERK643	8.17×10^{-10}	6.85×10^{-10}	2.04×10^{-5}	4	4(3)	2
IERK743(4)	1.11×10^{-9}	1.01×10^{-9}	1.86×10^{-5}	3	3	2

оценки (например, оценка $\tilde{p}_z = 4$ метода IERK643 или оценка $\tilde{p}_u = 2$ метода IERK432) можно объяснить особенностью решаемой задачи, а более низкие оценки позволили бы опровергнуть это предположение.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрены методы Рунге–Кутты, которые, имея 1-й СП, обладают свойствами методов более высокого СП. К ним относятся методы, имеющие повышенные (больше 1) значения ПСП либо КСП. При решении жестких ОДУ методы с повышенным ПСП позволяют избежать снижения порядка либо сделать его незначительным. А при решении ДАУ индексов 2 и 3 методы с повышенным ПСП или КСП позволяют повысить порядки сходимости p_y, p_z, p_u .

Методы с повышенным ПСП требуют выполнения дополнительных $\tilde{q} - 1$ стадий на каждом шаге. Однако многократное повышение точности этих методов по сравнению с обычными методами может компенсировать эти затраты и обеспечить заметное преимущество при решении жестких ОДУ и ДАУ высших индексов. Среди рассмотренных методов наибольший практический интерес представляют явные и обратные к ним методы. Отметим, что стадии $2, \dots, \tilde{q} + 1$ явных методов могут быть распараллелены. Отметим также, что на основе явных методов можно построить стабилизированные методы (см. [2], [12]), для которых дополнительные стадии составляют малую часть общих вычислительных затрат.

Обратные методы являются мононеявными, что обеспечивает более эффективную реализацию по сравнению с неявными методами общего вида. Дополнительное преимущество дает прогноз начального значения для итераций, порядок которого совпадает с порядком метода (см. разд. 5). В этом случае допустимо выполнять только одну ньютоновскую итерацию для решения алгебраической системы (5.1), в результате можно получить двухшаговый линейно неявный метод (одношаговые методы такого типа рассматривались в [44]).

Еще одно преимущество рассмотренных здесь обратных методов – высокий порядок L -затухания, равный p для основного и $p - 1$ для вложенного метода. Этот факт имеет существенное значение при решении ДАУ индексов 2 и 3. В [43] на простейшем примере было показано, что процедура контроля ошибки при решении

ДАУ может оказаться неустойчивой и привести к аварийной остановке. Чтобы этого не происходило, рекомендуют исключить из процедуры переменные высших индексов (в (6.3), (6.4) это переменные z, z_1, z_2, u). Однако это приводит к ослаблению контроля ошибки, к тому же индексы переменных могут быть неизвестны. Альтернативой может быть использование вложенных пар, в которых основной и вложенный методы имеют порядок L -затухания не меньше 2. При $p \geq 3$ все методы IERK обладают этим свойством.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Хайрер Э., Нёрсемт С., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.
2. *Скворцов Л.М.* Численное решение обыкновенных дифференциальных и дифференциально-алгебраических уравнений. М.: ДМК Пресс, 2022.
3. *Prothero A., Robinson A.* On the stability and accuracy of one-step methods for solving stiff systems of ordinary differential equations // Math. Comput. 1974. V. 28. № 125. P. 145–162.
4. *Деккер К., Вервер Я.* Устойчивость методов Рунге–Кутты для жестких нелинейных дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1988.
5. *Хайрер Э., Ваннер Г.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999.
6. *Butcher J.C.* Numerical methods for ordinary differential equations. Chichester: John Wiley and Sons, 2008.
7. *Скворцов Л.М.* Диагонально неявные FSAL-методы Рунге–Кутты для жестких и дифференциально-алгебраических систем // Матем. моделирование. 2002. Т. 14. № 2. С. 3–17.
8. *Скворцов Л. М.* Точность методов Рунге Кутты при решении жестких задач // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2003. Т. 43. № 9. С. 1374–1384.
9. *Скворцов Л.М.* Явные методы Рунге–Кутты для умеренно жестких задач // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2005. Т. 45. № 11. 2017–2030.
10. *Скворцов Л.М.* Диагонально неявные методы Рунге–Кутты для жестких задач // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2006. Т. 46. № 12. С. 2209–2222.
11. *Скворцов Л.М.* Модельные уравнения для исследования точности методов Рунге–Кутты // Матем. моделирование. 2010. Т. 22. № 5. С. 146–160.
12. *Скворцов Л.М.* Явные стабилизованные методы Рунге–Кутты // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2011. Т. 51. № 7. С. 1236–1250.
13. *Скворцов Л.М.* Явные адаптивные методы Рунге–Кутты для жестких и колебательных задач // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2011. Т. 51. № 8. С. 1434–1448.
14. *Скворцов Л.М.* О неявных методах Рунге–Кутты, полученных в результате обращения явных методов // Матем. моделирование. 2017. Т. 29. № 1. С. 3–19.
15. *Скворцов Л.М.* Как избежать снижения точности и порядка методов Рунге–Кутты при решении жестких задач // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2017. Т. 57. № 7. С. 1126–1141.
16. *Скворцов Л.М.* Неявные методы Рунге–Кутты с явными внутренними стадиями // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2018. Т. 58. № 3.
17. *Rang J.* An analysis of the Prothero–Robinson example for constructing new DIRK and ROW methods // J. Comput. Appl. Math. 2014. V. 262. P. 105–114.
18. *Rang J.* An analysis of the Prothero–Robinson example for constructing new adaptive ESDIRK methods of order 3 and 4 // Appl. Numer. Math. 2015. V. 94. P. 75–87.
19. *Rang J.* The Prothero and Robinson example: Convergence studies for Runge–Kutta and Rosenbrock–Wanner methods // Appl. Numer. Math. 2016. V. 108. P. 37–56.

20. Ketcheson D.I., Seibold B., Shirokoff D., Zhou D. DIRK schemes with high weak stage order // Lecture Notes in Comput. Science and Engng. V. 134. Spectral and High Order Methods for Partial Differential Equations. Springer, 2020. P. 453–463.
21. Biswas A., Ketcheson D.I., Seibold B., Shirokoff D. Design of DIRK schemes with high weak stage order // Commun. Appl. Math. Comput. Sci. 2023. V. 18. P. 1–28.
22. Biswas A., Ketcheson D.I., Seibold B., Shirokoff D. Algebraic structure of the weak stage order conditions for Runge–Kutta methods. // SIAM J. Numer. Anal. 2024. V. 62. № 1. P. 48–72.
23. Biswas A., Ketcheson D.I., Roberts S., Seibold B., Shirokoff D. Explicit Runge–Kutta methods that alleviate order reduction. <https://arxiv.org/abs/2310.02817>.
24. Rosales R.R., Seibold B., Shirokoff D., Zhou D. Spatial manifestations of order reductions in Runge–Kutta methods for initial boundary value problems // Commun. Math. Sci. 2024. V. 22. № 3. P. 613–653.
25. Hairer E., Lubich Ch., Roche M. The numerical solution of differential-algebraic systems by Runge–Kutta methods. Berlin: SpringerVerlag, 1989.
26. Jay L. Convergence of Runge–Kutta methods for differential-algebraic systems of index 3 // Appl. Numer. Math. 1995. V. 17. № 2. P. 97–118.
27. Jay L. Convergence of a class of Runge–Kutta methods for differential-algebraic systems of index 2 // BIT. 1993. V. 33. № 1. P. 137–150.
28. Бояринцев Ю.Е., Чистяков В.Ф. Алгебро-дифференциальные системы. Методы решения и исследования. Новосибирск: Наука, 1998.
29. Скворцов Л.М. Диагонально-неявные методы Рунге–Кутты для дифференциально-алгебраических уравнений индексов 2 и 3 // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2010. Т. 50. № 6. С. 1047–1059.
30. Hosea M.E., Shampine L.F. Analysis and implementation of TR-BDF2 // Appl. Numer. Math. 1996. V. 20. № 1–2. P. 21–37.
31. Cameron F., Palmroth M., Piche R. Quasi stage order conditions for SDIRK methods // Appl. Numer. Math. 2002. V. 42. № 1–3. P. 61–75.
32. Лебедев В.И. Как решать явными методами жесткие системы дифференциальных уравнений // Вычисл. процессы и системы. М.: Наука, 1991. Вып. 8. С. 237–291.
33. Новиков Е.А. Явные методы для жестких систем. Новосибирск: Наука, 1997.
34. Калиткин Н.Н., Пошивайло И.П. Вычисления с использованием обратных схем Рунге–Кутты // Матем. моделирование. 2013. Т. 25. № 10. С. 79–96.
35. Кочетков К.А., Ширков П.Д. L-затухающие ROW-методы третьего порядка точности // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1997. Т. 37. № 6. С. 699–710.
36. Cash J.R., Singhal A. Mono-implicit Runge–Kutta formulae for the numerical integration of stiff differential systems // IMA J. Numer. Anal. 1982. V. 2. P. 211–227.
37. Kulikov G.Yu., Shindin S.K. Adaptive nested implicit Runge–Kutta formulas of Gauss type // Appl. Numer. Math. 2009. V. 59. № 3–4. P. 707–722.
38. Куликов Г.Ю. Вложенные симметричные неявные гнездовые методы Рунге–Кутты типов Гаусса и Лобатто для решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений и гамильтоновых систем // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2015. Т. 55. № 6. С. 986–1007.
39. Alexander R. Diagonally implicit Runge–Kutta methods for stiff O.D.E.’s // SIAM J. Numer. Anal. 1977. V. 14. № 6. P. 1006–1021.
40. Ralston A. Runge–Kutta methods with minimal error bounds // Math. Comput. 1962. V. 16. P. 431–437.
41. Bogacki P., Shampine L.F. A 3(2) pair of Runge–Kutta formulas // Appl. Math. Lett. 1989. V. 2. № 4. P. 321–325.

42. Булатов М.В., Соловарова Л.С. О потере L-устойчивости неявного метода Эйлера для одной линейной задачи // Изв. Иркутского гос. ун-та. Сер. Математика. 2015. Т. 12. С. 3–11.
43. Скворцов Л.М. Методы ESDIRK третьего и четвертого порядков для жестких и дифференциально-алгебраических задач // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2022. Т. 62. № 5. С. 790–808.
44. Зубанов А.М., Кутрухин Н.Н., Ширков П.Д. О построении линейно неявных схем, LN-эквивалентных неявным методам Рунге–Кутты // Компьютерные исследования и моделирование. 2012. Т. 4. № 3. С. 483–496.

GENERALIZATIONS OF THE STAGE ORDER OF RUNGE–KUTTA METHODS

L. M. Skvortsov*

127051 Moscow, Trubnaya str., 51, bldg.. 1, 3B Service LLC, Russia

**e-mail: lm.skvo@gmail.com*

Received: 27.05.2024

Revised: 02.07.2024

Accepted: 31.08.2024

Abstract. The application of Runge–Kutta methods for solving rigid systems of ordinary differential equations and differential algebraic equations is considered. When solving such problems, the effect of reducing the order is often manifested, when, with a given accuracy, the real order of the method turns out to be lower than the classical order, which inevitably leads to increased computational costs. To avoid reducing the order, the method must have a sufficiently high stage order. However, the methods that provide the most convenient and efficient implementation have a low stage order. Therefore, the task of constructing methods that, at a low stage order, have the properties of methods of a higher stage order is relevant. This article is devoted to the construction of methods of this type. Singly diagonal-implicit, explicit methods and those inverse to the explicit ones are considered. The results of solving test problems are presented.

Keywords: Runge–Kutta methods, rigid and differential algebraic problems, stage order, pseudo-stage order, weak stage order, quasi-stage order.